

этом можно использовать как 2D, так и 3D графику. Например, для демонстрации Солнечной системы можно создать 3D мир, в котором бы можно было рассмотреть звезду и планеты. А различные художественные произведения и их авторов можно «оживить», воссоздав их в 3d. Более того, можно создать игру, которая бы повторяла сюжет того или иного романа.

На сегодняшний момент в инструментальной системе реализованы: обработка событий клавиатуры и мыши; поддержка форматов tga, png, bmp и jpg; камера 2D; отрисовка 2D примитивов; поддержка шрифтов; 2D коллизии; спрайтовый движок; поддержка команд DirectX; логирование событий; работа с высокоточными таймерами; коррекция пропорций выводимого изображения относительно заданных размеров; рендеринг статичных спрайтов, спрайтов с анимацией и тайлов; отсечение невидимых спрайтов (culling); камеры с возможностью перемещения, увеличения и поворота содержимого сцены, также эффект тряски камеры; надстройка над Squall по работе со звуком; оптимизирован вывод спрайтов, что позволяет запускать приложения даже на слабых машинах.

Огородников И.И., Кузнецов М.В., Разинкин А.С.
МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ
ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ С ПОМОЩЬЮ
ПРОГРАММНОГО КОДА EDAC

i_ogorodnikov@mail.ru

ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н. Ельцина»

г. Екатеринбург

Ogorodnikov I.I., Kuznetsov M.V., Razinkin A.S.
EDAC PROGRAM CODE FOR THE SIMULATION OF
PHOTOELECTRON DIFFRACTION

С помощью программного кода EDAC проведено моделирование картин рентгеновской фотоэлектронной дифракции в рамках приближения MSC-SW для поверхности слоистого дихалькогенида 1T-TiSe₂.

X-ray photoelectron diffraction patterns has been simulated by the means of EDAC program code within MSC-SW approximation for the surface of layered dichalcogenide 1T-TiSe₂.

Исчерпывающее представление о положениях атомов является необходимой предпосылкой для понимания свойств поверхности различных материалов. Среди многочисленных методов исследования, доступных исследователю для получения кристаллографических данных, рентгеновская фотоэлектронная дифракция (РФД) зарекомендовала себя с лучшей стороны во многом

благодаря химической чувствительности и возможности измерять атомные смещения порядка нескольких долей ангстрема. Тем не менее без привлечения теоретического моделирования бывает довольно трудно разобраться в различных структурах, встречающихся в РФД данных, и сопоставить их с реальными положениями атомов в кристалле. Вплоть до недавнего времени дифракционные картины моделировались в приближении однократного рассеяния. Такой подход оказывается неприемлемым для многослойных систем, в которых многократное рассеяние приобретает большое значение.

В настоящее время благодаря разработке новых компьютерных кодов и появлению все более мощных доступных электронных вычислительных устройств стало возможным моделировать РФД дифракцию в приближении многократного рассеяния. Более того, развитие современных сетевых технологий позволяет проводить такие расчеты в онлайн-режиме с помощью так называемых виджетов, которые можно рассматривать в качестве сетевого образовательного ресурса.

В настоящей работе проведены вычисления в рамках MSC-SW модели многократного рассеяния (multiple scattering cluster, MSC) с учетом сферических фотоэлектронных волн (spherical waves, SW) для выделенного кластера. Для вычислений нами была использована компьютерная программа EDAC (Electron Diffraction in Atomic Clusters), разработанная F. Javier Garcia de Abajo, Michel A. Van Hove и Chuck Fadley в Lawrence Berkley National Laboratory (Калифорния) на основе MSC-SW-приближения для выделенного кластера [1]. Выбор данного программного кода обусловлен следующими особенностями:

- время расчета $\sim N^2 \max^3$ (размер кластера вплоть до нескольких тысяч атомов);
- используется точная форма записи функции многократного рассеяния Грина для сферической волны;
- с помощью итерационного метода обеспечивается быстрая сходимость рядов многократного рассеяния по сравнению с другими методами, и сходимость происходит в тех случаях, когда последние не приводят к сходимости;
- фазовые сдвиги рассеяния и радиальные матричные элементы рассчитываются непосредственно внутри кода (не требуется загружать данные, рассчитанные в других программах).

Следует отметить, что в случае небольших по числу атомов кластеров с программным кодом EDAC можно работать в онлайн режиме на странице автора (<http://nanophotonics.csic.es/>). При необходимости проведения более сложных расчетов его можно скачать для автономной работы.

Кластерная модель, используемая в программном коде, заключается в представлении твердого тела конечным числом атомов N , окружающих атом-эмиттер. Конечная длина свободного пробега ограничивает расстояние, которое может проходить фотоэлектрон в твердом теле, не испытывая неупругие

столкновения, что оправдывает выбор кластера ограниченного размера. Такой подход не требует наличия симметрии дальнего порядка и находит применение, в частности, когда трансляционная симметрия кристалла нарушается вследствие случайно распределенных адсорбатов и дефектов или локализованного характера источника электронов, как в случае РФД и ЭОД. Ранее кластерный метод нашел широкое применение в рамках однократного рассеяния, что позволило воспроизводить качественно, а в некоторых случаях и количественно экспериментально наблюдаемые особенности РФД и XAFS. Тем не менее, чтобы повысить точность измерений и расширить возможности структурного анализа, необходимо перейти к рассмотрению многократного рассеяния.

Многократное рассеяние проводится вплоть до заданного пользователем порядка l . В коде доступны различные итерационные методы. Общее время выполнения расчетов пропорционально числу комплексных перемножений, которое нужно выполнить, и составляет $T_{\text{iter}} \sim nN^2(l_{\text{max}}+1)^3$, где l_{max} является максимальным значением квантового числа орбитального момента импульса. Точное решение самосогласованных уравнений может быть выполнено за время, пропорциональное $T_{\text{exact}} \sim N^3(l_{\text{max}}+1)^6$ (такое решение очень требовательно к вычислительным ресурсам компьютера и может быть выполнено только для небольших значений N и l_{max}).

Рассмотрим работу программного кода EDAC на примере 1T-TiSe₂. Слоистые дихалькогениды переходных металлов (СДПМ) политипа 1T имеют гексагональную слоистую структуру CdI₂ (рис. 1) с пространственной группой симметрии D_{3d}^3 ($P\bar{3}m1$), составленную из блоков молекулярных слоев [X-Ti-X]. Внутри слоев атомы связаны за счет сильных ковалентно-ионных взаимодействий, между отдельными слоями существуют слабые ван-дер-ваальсовы связи. Как следствие, промежутки между такими блоками существенно превышают межатомные расстояния внутри блоков. В результате внедрения атомов различных металлов в пространство между слоями решетки-матрицы образуются разнообразные интеркалатные материалы. В случае 1T-TiSe₂ выбраны следующие параметры решетки: $a = 3.535 \text{ \AA}$, $c = 6.004 \text{ \AA}$ [2].

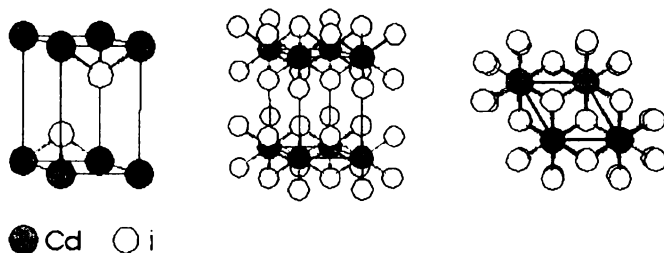


Рис. 1. Схематическое представление структура CdI₂

Число атомов в кластере N определяется с помощью параметра R_{\max} . На рисунке показано, как R_{\max} ограничивает объем параболического или сферического кластера вокруг эмиттера. Выбрано следующее значение $R_{\max} = 27.63 \text{ \AA}$ для $E_{\text{kin}} = 798.2 \text{ эВ}$ (остовный уровень $\text{Ti } 2p_{3/2}$ возбуждается с помощью $\text{MgK}\alpha$ излучения с энергией 1253.6 эВ), что хорошо согласуется с рассчитанной далее неупругой длиной свободного пробега. Для повышения вклада рассеяния на атомах, расположенных между эмиттером и поверхностью, в расчетах выбрана параболическая форма кластера. Длина неупругого свободного пробега (в ангстремах) может быть рассчитана с помощью TPP-2M формулы [3]:

$$\lambda = \frac{E}{E_p^2 \left\{ \beta \cdot \ln(\gamma E) - \frac{C}{E} + \frac{D}{E^2} \right\}}, \quad (1)$$

где E – энергия электрона (в эВ), $E_p = 28.8(N_v \rho / M)^{1/2}$ – плазменная энергия свободного электрона (в эВ), ρ – плотность (в $\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$), N_v – число валентных электронов на одну молекулу, а M – атомный молекулярный вес; β , γ , C и D – коэффициенты. В соответствии с рассчитанным для фотоэлектронов с $E_{\text{kin}} = 798.2 \text{ эВ}$ значения $\lambda \approx 13.815 \text{ \AA}$ выбрали два эмиттера вплоть до глубины 7.729 \AA под поверхность. Число атомов в кластере, окружающем первый и второй эмиттеры, оказалось равным $N_{s1} = 774$ и $N_{s2} = 852$ соответственно (рис. 2). Результирующая дифракционная картина получена путем усреднения. Добавление внутреннего потенциала V_0 позволяет учесть рефракцию фотоэлектронов на поверхности. Для TiSe_2 $V_0 = 10 \text{ эВ}$ [4]. Расчеты были выполнены для температуры $T = 300 \text{ K}$, для учета тепловых колебаний задана температура Дебая ϑ_D . Наилучшее соответствие достигается при оптимизации параметров l_{\max} , R_{\max} , ϑ_D , n и числа эмиттеров.

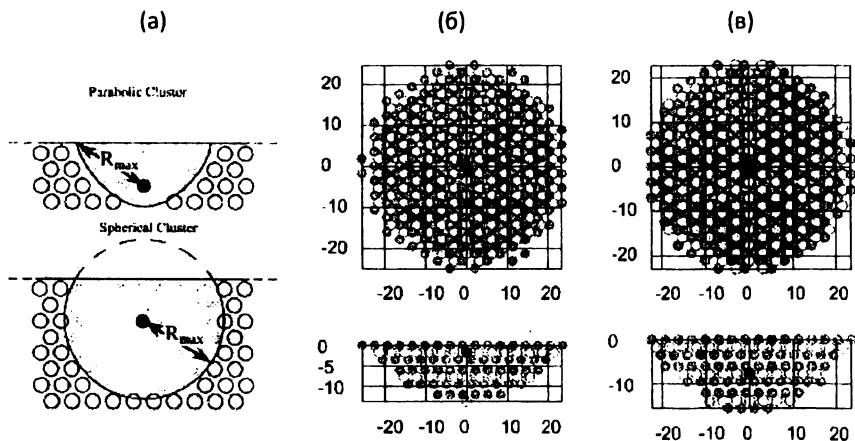


Рис. 2. Форма кластера как функция R_{\max} (а) и использованные в расчетах параболические атомные кластеры 1T-TiSe_2 для первого (б) и второго эмиттеров (в), $R_{\max} = 27.63 \text{ \AA}$. Черным цветом выделен эмиттер

Рассмотрим более подробно оптимизацию по порядку многократного рассеяния n . Значение $n = 0$ соответствует волновой функции фотоэлектрона при отсутствии рассеяния, $n = 1$ – в приближении однократного рассеяния. Как показывает практика, в большинстве случаев относительно хорошая сходимость результатов достигается в диапазоне от 15 до 20. Переход к большим порядкам многократного рассеяния, в частности, позволяет устранить эффект увеличения интенсивности эмиссии вдоль плотно упакованных плоскостей и рядов атомов, что уже оправдывает учет многократного рассеяния.

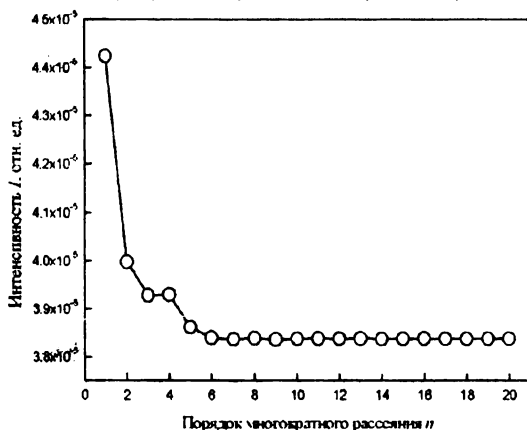


Рис. 3. График зависимости интенсивности от порядка многократного рассеяния

Структура кластера, наилучшим образом соответствующего экспериментальным данным, устанавливается с помощью фактора достоверности R :

$$R = \frac{\sum (I_{\text{теор}} - I_{\text{эксп}})}{\sum I_{\text{эксп}}}. \quad (2)$$

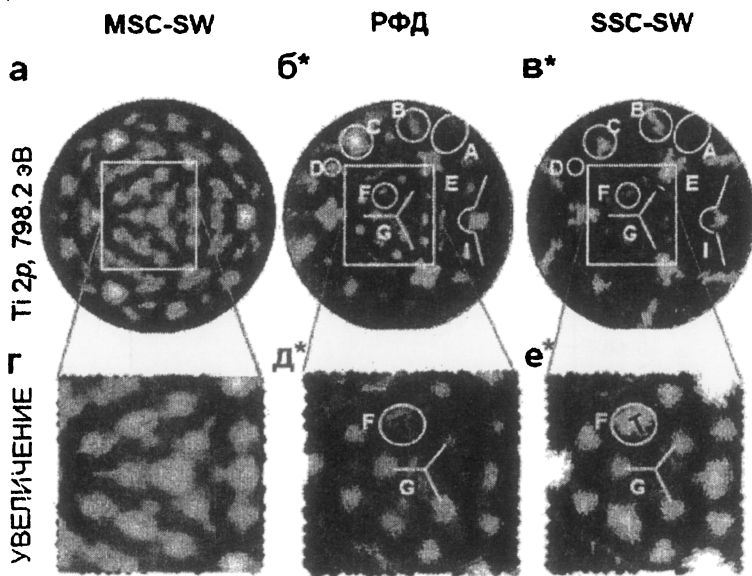
Дифракционные картины, приведенные на рисунке, нормализованы по интенсивности следующим образом: для каждого полярного угла интенсивности, для различных азимутальных углов делились на среднюю интенсивность для данного полярного угла.

$$I_{\text{норм}}(\theta, \varphi) = \frac{I(\theta, \varphi)}{\sum_{i=1}^{N(\theta)} I(\theta, \varphi_i) / N(\theta)}. \quad (3)$$

Рассчитанные дифракционные картины хорошо согласуются с приведенными в литературе [5] экспериментальными данными.

В целом расчеты в приближении многократного рассеяния оказываются необходимыми для повышения точности моделирования экспериментальных данных и повышения надежности теоретических результатов, в особенности по отношению к форме и интенсивности пиков. Такое соответствие не может быть

достигнуто в приближении однократного рассеяния для таких многослойных материалов, как $1T\text{-TiSe}_2$.



* D. Stoltz, S.E. Stoltz Physica B 298 (2007) 172-176

Рис. 4. Стереографические 2п-проекции дифракции $1T\text{-TiSe}_2$ для эмиссии из состояния $Ti\ 2p_{3/2}$ (кинетическая энергия $E_{kin} = 798.2$ эВ), полученные экспериментально (б) и в результате расчета в рамках моделей SSC-SW (в) и MSC-SW (а). Максимальный полярный угол $\vartheta = 88^\circ$. Центральные области (а), (б) и (в) увеличены и приведены в том же диапазоне интенсивностей (г), (д) и (е) соответственно

Данные материалы могут представлять интерес для специалистов в области физикохимии твердого тела, поверхностных явлений, рентгеновской фотоэлектронной дифракции и студентов старших курсов университетов. В настоящее время программа EDAC используется в ходе учебного процесса при подготовке аспирантов по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния» кафедры экспериментальной физики.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. F.J. Garcia de Abajo Hove and C.S. Fadley. / F.J. Garcia de Abajo, M.A. Van. – Phys. Rev. B 63, 75404 (2001).
2. J.A. Wilson, A.D. Yoffe, Adv. Phys. 18 (1969) 193.
3. Tanuma, Powell, and Penn, Surf. and Interface Anal. 21, 165 (1994)/
4. Anderson O, Manzke R and Skibowski M. Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 2188-91/
5. Stoltz D., Stoltz S.E. Physica B. 398 (2007) 172-177/